



TITLE:

44. 一般化されたランダムウォーク
のふるまい: 界面の運動(基研研究
会「パターン形成, その運動と統計
」, 研究会報告)

AUTHOR(S):

原, 啓明

CITATION:

原, 啓明. 44. 一般化されたランダムウォークのふるまい: 界面の運動(基
研研究会「パターン形成, その運動と統計」, 研究会報告). 物性研究
1987, 49(1): 147-151

ISSUE DATE:

1987-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92823>

RIGHT:

状であるが最終的には $v_2 = 4$ の形状になってしまう。

次に $d = 2$ のときを考える。本質的な特徴は $d = 1$ のときと変わらないが初期条件のとり方でいろいろな波面の形状ができる。図3は x 方向(横)に進行する指状の波面を表わしている。これは初期条件として

$$A_i(x) = A_0 \exp(-(x/\sigma)^2), \quad (6a)$$

$$A_i(x) = A_0 / (1 + rx^2), \quad (6b)$$

という2種類の関数を y 方向に適当に並べ

ることによって実現できる。一次元ならば図1からわかるように、ガウス関数(6a)のときは $v = 2$ のshock解に近づき、ローレンツ関数(6b)では $v \rightarrow \infty$ になろうとするはずである。今ここではこの2つの関数を y 方向に適当に並べたため、拡散項があるにもかかわらずこのような構造が出現してくることになる。

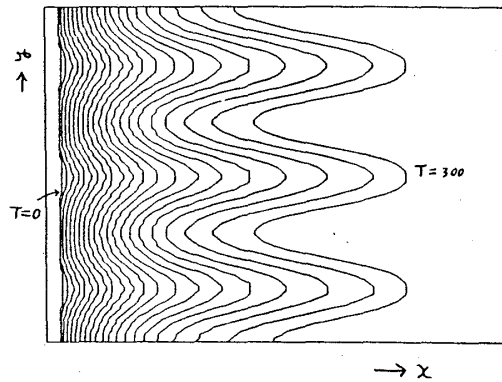


図3. 指状波面の例。波面は各時刻で $A = 0.5$ となる点を結ぶことによって示した。

44. 一般化されたランダムウォークのふるまい 界面の運動

東北大・工 原 啓 明

通常のランダムウォークの漸化式において、「とび移る確率」(状態を表わす「位置」間の遷移確率)を一般化すれば、大部分の確率過程は、形式的には漸化式によって表現可能となる。¹⁾

ところで「界面」は、熱力学的ポテンシャルで記述される系以外でも見られる。たとえば、生態学における個体分布²⁾、神経回路網の先端³⁾等はその例である。これ等の系では、熱力学的ポテンシャルは必ずしも明確に定義された重要な量ではない。

本研究では、生態学における個体分布(バクテリア)²⁾を例にとり、系をプロセスによって特徴づける量(作用量)を導出する1つの方法について述べる。

1個から増殖するバクテリアの1つのコロニーに着目する。個体数の増加に伴い、コロニーのサイズは大きくなる。時刻(ステップ) N におけるコロニーの個体数が m である確率を $W^{(c)}(m, N)$ と書くと、 $W^{(c)}$ は漸化式によって

$$W^{(c)}(m_\nu, N_\nu) = \sum_{\alpha=\pm, 0} P^\alpha(m_\nu | m_\nu - \alpha \cdot 1) W^{(c)}(m_\nu - \alpha \cdot 1, N_\nu - 1), \quad (1)$$

$$\left(\sum_{\alpha=\pm, 0} P^\alpha(m_\nu + \alpha \cdot 1 | m_\nu) = 1 \right)$$

と表わされる。記号 $\alpha \cdot 1$ は $\alpha = \pm, 0$ に対して、 $\pm 1, 0$ の値をとる。 N_ν, m_ν の添字 ν は $\nu = i$ (初期), e (指数期), s (定常期) における N, m を表わす(図1)参照。 $P_{N_\nu-1}^\alpha(m_\nu | m_\nu - \alpha \cdot 1)$ は個体数 $m_\nu - \alpha \cdot 1$ から m_ν への遷移確率である。

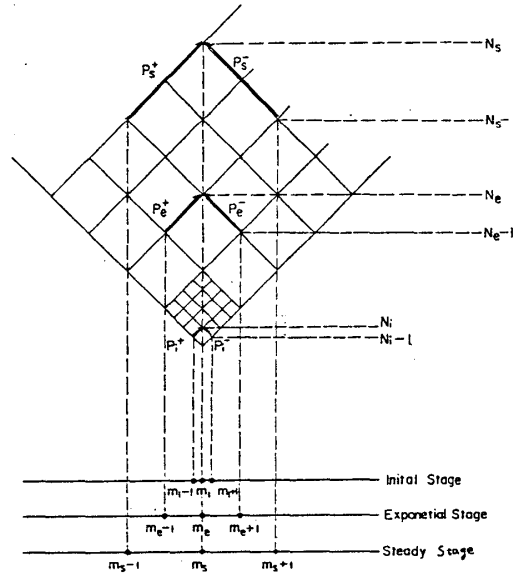


図1. 各状態 ν ($= i$: 初期, e : 指数期, s : 定常期) におけるプロセス

(1)で $N_\nu \rightarrow t_\nu (= N_\nu \Delta t_\nu)$ として、連続化すると

$$\frac{\partial W^{(c)}(m_\nu, t_\nu)}{\partial t_\nu} = \frac{1}{\Delta t_\nu} \{ P^+(m_\nu | m_\nu - 1) W^{(c)}(m_\nu - 1, t_\nu) + P^-(m_\nu | m_\nu + 1) W^{(c)}(m_\nu + 1, t_\nu) - [P^-(m_\nu - 1 | m_\nu) + P^+(m_\nu + 1 | m_\nu)] W^{(c)}(m_\nu, t_\nu) \} \quad (2)$$

となる。 $P^\alpha(m_\nu \pm \alpha \cdot 1 | m_\nu) / \Delta t_\nu \equiv \Gamma_{m_\nu}^\alpha$ は各状態での発生率($\Gamma_{m_\nu}^+$), 消滅率($\Gamma_{m_\nu}^-$), 潜伏率($\Gamma_{m_\nu}^0$)

を表わす。 ν 状態における平均個体数を $M_\nu(t_\nu)$ ($= \sum_{m_\nu=0}^{\infty} m_\nu W^{(c)}(m_\nu, t_\nu)$) と書き、 $\Gamma_{m_\nu}^\alpha$ を m_ν に依存しない部分 ($r_{0,\nu}^\alpha$) と m_ν に比例する部分 ($m_\nu r_{0,1}^\alpha$) の和で表わすと(2)から、 $M_\nu(t)$ に対する方程式は、

$$\frac{dM_\nu(t_\nu)}{dt_\nu} = (r_{0,\nu}^+ + r_{1,\nu}^+ - r_{1,\nu}^-) M_\nu(t_\nu) + r_{0,\nu}^+ \quad (3)$$

となる。各状態で初期値を設定すると、 $\nu = i$ (初期) では、 $M_i(t_i) \propto e^{bt_i}$ ($b = r_{1,i}^+ - r_{1,i}^-$)、 $\nu = e$ (指数期) では、 $M_e(t_e) \propto e^{ct_e}$ ($c = r_{0,e}^+ + r_{1,e}^+ - r_{1,e}^-$)、 $\nu = s$ (定常期) では、 $M_s(t_s) \propto t_s$ から $[1 - e^{-c't_s}]$ となる。このふるまいは実験による結果を説明出来る。 $M_\nu(t_\nu)$ の各時間変化は、スケーリングを行い、各状態をなめらかにつないで $M(t)$ にすると、シグモイド型となる。

図2に示すコロニーのサイズを、半径 $r(t)$ 厚み h 、平均密度 ρ で表わすと $M(t) = \pi r^2(t) h \rho$ となる。この $M(t)$ の「形態」に注目すると、増殖はコロニー全体からその周辺部 $M_g (= 2\pi r(t) \Delta d h \rho)$ で行われるようになる²⁾。従って $M(t)$ から $r(t)$ を評価すると、 $r(t)$ は $e^{\frac{b}{2}t}$ 、 $e^{\frac{c}{2}t}$ 、 $[1 - e^{-c't}]^{\frac{1}{2}}$ から $r(t) \propto t$ 、やがて特別に増殖する部分はなくなり $M(t)$ の変化は一定となり $r(t) \propto \sqrt{t}$ となる。



図2. コロニーのサイズと増殖する部分(斜線)。

$h = 1$ として、界面の形状を表わす関数を $\phi(x, t)$ とすると、 $\phi(x, t)$ ($= \phi_x(x, t) = \partial \phi / \partial x$) は形を保持する上に凸の確率密度関数とみなすことが出来る。これはピークの位置が速度 $r_t(t)$ ($= dr(t)/dt$) で移動するソリトン解で表わされる⁴⁾。即ち、

$$\phi_t(x, t) = -[k_0 \phi - k_1 g(t)] \phi_x - k_2 \phi_{xxx} \equiv \hat{L}_{NL} \phi \quad (4)$$

の解

$$\begin{aligned} \phi(x, t) &= A \operatorname{sech}^2 \sqrt{\frac{k_0 A}{12 k_2}} (x - r(t)) \\ r(t) &= \frac{k_0 A}{3} t + k_1 \int_0^t g(t') dt' \end{aligned} \quad (5)$$

A 、 k_i ($i = 0, 1, 2$) は定数、 $g(t)$ は $r_t(t)$ の t -依存性で決まる関数である。

(4)の $\phi_t = \hat{L}_{NL} \phi$ の解を $\phi(x, t) = (\int^x \phi(x, t) dx)$ によって $\varphi(x, t)$ に変換し、 $x -$

$r(t) = z$ とおけば, $\varphi(z)$ に関する方程式は, 次のラグランジュ関数 L_0

$$L_0(\varphi, \varphi_z) = -\frac{1}{2}(\varphi_z)^2 - V(\varphi), \quad (6)$$

$$V(\varphi) = \frac{1}{4\lambda}(\varphi^2 - \frac{m^2}{\lambda})^2,$$

$$(\lambda = \frac{1}{144}(\frac{k_0}{k_2})^2, \quad m = \sqrt{\frac{k_0 A}{6 k_2}})$$

から導出される, Euler-Lagrange (EL) 方程式となる。

z 軸の空間を d 個に分割しよう。ステップ \tilde{N} で各区間の代表点がり得る値 (m_1, m_2, \dots, m_d) を確率変数とみると, 見かけ上 d 次元の確率過程となる。また, 確率密度関数に相当する $W(m_1, m_2, \dots, m_d; \tilde{N})$ は(1)式を拡張した d 次元の一般化されたランダムウォーク (GRW) の式となる。漸化式の連続体近似 ($\tilde{N} \rightarrow \tau (= \tilde{N} \Delta \tau)$, $m_i \rightarrow \varphi_i (= m_i a)$ として $a^2 / \Delta \tau =$ 一定のもとで $\Delta \tau \rightarrow 0$, $a \rightarrow 0$) を行くと, 汎関数 Fokker-Planck (FP) 方程式

$$\frac{\partial w(\varphi, \tau)}{\partial \tau} = - \int dz \frac{\delta}{\delta \varphi} [K^{(1)}(\varphi, \tau) - \frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta \varphi} K^{(2)}(\varphi, \tau)] w(\varphi, \tau) \quad (7)$$

が得られる。 $K^{(1)}, K^{(2)}$ は GRW の “とび移る確率” で表わされた汎関数である。

(7) の定常分布 ($\tau \rightarrow \infty$) の形式解は

$$W(\varphi) = e^{-S[\varphi]} \quad (S[\varphi] = \int L(\varphi, \varphi_z) dz) \quad (8)$$

の形になる。 $L(\varphi, \varphi_z)$ は $K^{(1)}, K^{(2)}$ で表わされた Lagrange 関数である。また(6)の L_0 は(8)式の $S[\varphi]$ に対する停留値 $\bar{\varphi}$ を与える量である。

$S[\varphi]$ は $\varphi(z)$, あるいは $\phi(z) (= \varphi_z)$ で規定されるプロセスを特徴づける量で, “熱力学的ポテンシャル” の役目をする。従って, これによって個体の発生を調べたり, φ の汎関数 $F(\varphi)$ の期待値は

$$\langle F(\varphi) \rangle = \int d\varphi F(\varphi) e^{-S[\varphi]} / \int d\varphi e^{-S[\varphi]} \quad (9)$$

となる。とくに $F(\varphi) = \varphi(z) \varphi(z')$ の期待値から, コロニー間の相関が分かる。

おわりに論文やデーターをいただいた東北大農研の服部勉先生と望月正己氏に感謝します。

参考文献

- 1) H. Hara: Prog. Theor. Phys. **60** (1978) 296.
Phys. Rev. **B20** (1979) 4062.
H. Hara and T. Obata: Phys. Rev. **B23** (1985) 4403.
- 2) T. Hattori: Reports of Institute for Agricultural Research, Tohoku Univ. **34** (1985) 1.
- 3) D. Bray and K. Chapman: J. Neuroscience **5** (1985) 3204.
- 4) 原 啓明：物性研究，44（1985）505.

45. 蒸気－液体界面におけるぬれ転移

農工大・教養 松山 明彦，田中 文彦

§ 1. 序

2 相分離状態にある溶液相 (α , β 相) が，第 3 の相 (x 相；蒸気あるいは固体) と接触している時，溶液の臨界温度付近ではエネルギー的に有利な β 相が x , α 相の間に侵入して層を形成する。通常 β 相は高濃度側の相である。温度を臨界点から下げるとそれぞれの界面に働く張力が変化して図 1 のような小滴を形成する。各々の界面張力は境界面を縮める方向に働き平衡時にはヤングの式

$$r \cos \theta = r_{x\alpha} - r_{x\beta} \quad (1)$$

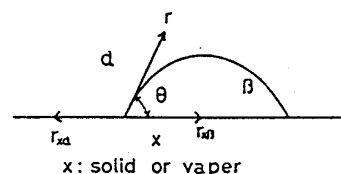


図 1

がなりたつ。 $\theta = 0$ の場合は β 相が x , α 界面に拡がり

巨視的な膜を形成する。これを完全ぬれ (complete wetting) と呼ぶ。 $\theta > 0$ で β 相が小滴を形成する場合を部分ぬれ (partial wetting) と呼ぶ。臨界点近傍では $r \sim (T_c - T)^{1.3}$, $r_{x\alpha} - r_{x\beta} \sim (T_c - T)^{0.3}$ であるから $\cos \theta \sim (T_c - T)^{-1}$ となり温度が臨界点に近づけば必ず $\theta = 0$ の条件が満たされることがわかる。完全ぬれ⇔部分ぬれの転移は Cahn⁽¹⁾ によって理論的に予言された。その後 Schmit, Moldover⁽²⁾ が低分子溶液の蒸気－液体界面においてぬれ転移を検証した報告がある。

では高分子溶液の界面においてぬれ現象はどのようなふるまいをするのであろうか。我々の